

# FI199A - Nanociência e Materiais Avançados

## Ementa:

Semanas	Programação
<b>6 semanas</b> <b>“bloco básico”:</b> - Materiais - Técnicas experimentais e teóricas	<p><b>Aula 1 (D.Ugarte).</b></p> <p>Introd ciência Materiais.Historia: idades, pedra, bronze,ferro, .....,silício/plástico, nano. Ciência dos materiais como uma ponte entre Fis,Quim,Mat-&gt;Eng, Multidisciplinaridade. Tipos de materiais: metais, cerâmicos, polímeros, compósitos.Exemplos: da ciência básica a aplicação</p> <p><b>Aula 2 (D.Ugarte).</b></p> <p>Propriedades dos materiais (desde uma perspectiva Mat.Sci.)- Mecânica: Stress-Strain,Elasticoplastico,otimização/strengthening; Elétrica: condutores, semicondutores, dielétricos, polímeros; Magnética: para-,ferro-, antiferro-, ferrimagnetismo,etc.... Térmicas: Calor especific., thermal expansion, thermal conduc., thermal stress; Ópticas: color, opacity, lumisc, lasers, LEDS</p> <p><b>Aula 3(D.Ugarte).</b></p> <p>Microscopias (Introd Geral): Introd. Resolução, imagens, capacidade. Analítica. Mic. Ótica, confoc., Super-resolution, Tip-based (AFM,STM).Modern approaches (ex. 3D (tomograf.), in –situ.</p> <p><b>Aula 4 (D.Ugarte).</b></p> <p>Microscopias Eletrônicas (SEM,TEM) e FIB fonte e otica de eletrons;SEM: modos de imagens;TEM: difra eletronica, imagens convencionais e HR; STEM: TEM, HAADF; Análise R-X and EELS;FIB- Aplicações básicas, análise, fabricação de amostra, e preparação de amostras</p> <p><b>Aula 5 (M.Cotta).</b></p> <p>STM/AFM - Interações fundamentais. Princípios e mecanismos, Microscópio de Tunelamento e Microscópio de Força Atômica. STS e Espectroscopia de força. Modos dinâmicos do AFM.</p> <p><b>Aula 6 (O.Couto).</b></p> <p>Técnicas ópticas (panorama geral) - Conceitos fundamentais. Tipos de espectroscopia (atômica, vibracional....). Fluorescência, PL, PLE, MagnetoPL, CL, Raman, IR,... Acoplamento com microscopia.</p> <p><b>Aula 7 (A.de Siervo).</b></p> <p>Técnicas Síncrotron (panorama geral) - XAS, XANES, EXAFS, SAXS, DRX, XPS, Dicroísmo</p>

	<p><b>Aula 8 (A.Fonseca e D.Galvão).</b></p> <p>"Visão geral dos métodos distintos de se modelar e simular materiais" - "Teoria vs. Experimento; Teoria vs. modelo; nível quântico, dinâmica molecular clássica, elementos finitos, modelagem em nível continuum; erros numéricos/computacionais."</p> <p><b>Aula 9 (A.Fonseca e D.Galvão).</b></p> <p>"Métodos quânticos de simulação atômica" - aproximação bohr oppenheimer; Método de Hartree-Fock; DFT; teoremas Kohn-Shan</p> <p><b>Aula 10 (A.Fonseca e D.Galvão).</b></p> <p>"Métodos clássicos de simulação atômica" - *Por quê?* ou *quando* usar dinâmica molecular clássica; a aproximação de Bohr-Oppenheimer; dinâmicas de Newton e hamiltoniana; algoritmos de dinâmica molecular; tipos de *ensembles*; termostatos; potenciais: MEAM, CHARMM e AIREBO; pacotes computacionais: LAMMPS e NAMD; equilíbrio de um sistema; cálculo de propriedades mecânicas e térmicas de materiais</p> <p><b>Aula 11 (A.Fonseca e D.Galvão).</b></p> <p>"Exemplos de problemas relevantes resolvidos pela teoria/simulação" - exemplos de problemas na literatura recente/atual de problemas e questões envolvendo materiais onde a modelagem e/ou simulação atômica foram relevantes para solução</p> <p><b>Aula 12 (M.Cotta).</b></p> <p>Problemas - Estendendo o tópico da aula 11, discutir problemas reais, e o uso conjunto de várias técnicas, tanto teóricas como experimentais, para sua solução.</p> <p><b>Aula 13. Avaliação 1</b></p>
<p><b>8 semanas:</b></p> <p><b>“bloco avançado”</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- superfícies</li> <li>- nanomateriais</li> <li>- aplicações</li> </ul>	<p><b>Aula 14 (A.de Siervo).</b></p> <p>Ciência de superfícies - Exemplos em catálise heterogênea (Haber-Bosch, Fischer-Tropsch) ; Semicondutores e nanotecnologia.</p> <p><b>Aula 15 (A.de Siervo).</b></p> <p>Fundamentos - Bulk versus superfície; Superfícies limpas, vicinais, baixos índices de Miller, Ligas e óxidos; Reconstruções e relaxação de superfícies; Adsorbatos, Adsorbatos induzindo reconstruções, ilhas e nanodépósitos</p>

**Aula 16 (A.de Siervo).**

Estrutura atômica e eletrônica de superfícies - Estados eletrônicos de volume vs superfícies; Metais, semicondutores, isolantes; Efeitos de tamanho em sistemas nanométricos; Estrutura atômica e eletrônica local: STM, STS. Exemplos do estado-da-arte; Estrutura atômica e eletrônica global: XPS, ARPES, XPD, LEED. Exemplos do estado-da arte.

**Aula 17 (V.Rodrigues).**

Clusters

**Aula 18 (V.Rodrigues).**

Instrumentação

**Aula 19 (V.Rodrigues).**

Aplicações/trabalhos de destaque/desafios científicos

**Aula 20 (O.Couto).**

Nanoestruturas semicondutoras - Propriedades eletrônicas: estrutura de banda, efeitos de confinamento quântico e dimensionalidade, exemplos de materiais e estruturas.

**Aula 21 (O.Couto).**

Propriedades Ópticas - Interação luz-matéria, transições ópticas (absorção, emissão espontânea e estimulada), recombinações radiativas e não-radiativas, éxcitons em nanoestruturas semicondutoras, complexo de éxcitons.

**Aula 22 (O.Couto).**

Caracterização e manipulação óptica - Regras de seleção, detecção óptica de estados quânticos de nanoestruturas, geração e manipulação de estados de spins e interação spin-órbita em nanoestruturas, aplicações de micro-fotoluminescência, magneto-fotoluminescência, fotoluminescência resolvida no tempo.

**Aulas 23 a 26(K.Pirota e F.Beron).**

Introdução ao magnetismo na matéria - Interações fundamentais em magnetismo e seus comprimentos críticos; Alterações fundamentais no comportamento magnético em nanoestruturas (novas propriedades)

Aplicações e desafios - Síntese e caracterização (magnética e microscopia) de nanoestruturas magnéticas de interesse.

**Aula 27 (A.Riul Jr).**

Estruturas supramoleculares e sistemas automontados - bottom-up vs top-down;

forças intermoleculares envolvidas e balanço de forças necessário para agregação espontânea de materiais sobre superfícies sólidas (superfícies e interfaces); nanoestruturação de materiais através de mecanismos bottom-up. Aplicações e desenvolvimento de nanotecnologia.

**Aula 28 (M.Cotta).**

AFM em matéria mole e nanobio - Imagens em líquido, espectroscopia de força, acoplamento AFM + microscopia óptica, fluo e/ou Raman, exemplos da literatura

**Aula 29 (A.Riul Jr).**

Biomateriais, lab-on-a-chip, dispositivos e sensores - biomateriais; materiais self-healing e superhidrofóbicos (quem são e onde têm sido usados); dispositivos: OLEDs e eletrônica orgânica) e lab-on-a-chip e organ-on-a-chip, biossensores; sensores (nariz e língua eletrônica)

**Aula 30. Avaliação 2**

**Bibliografia:**

1. Materials Science and Engineering: An Introduction, 9th Edition, by William D. Callister e David G. Rethwisch
2. The Science and Engineering of Materials. Sixth Edition. Donald R. Askeland. University of Missouri—Rolla, Emeritus. Pradeep P. Fulay. University of Pittsburgh.
3. Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science. Authors: Williams, David B., Carter, C. Barry
4. Applications of Aberration-Corrected Scanning Transmission Electron Microscopy  
Rik Brydson & Mervyn D. Shannon
5. Clusters of Atoms and Molecules. Theory, Experiment, and Clusters of Atoms  
Editors: Haberland, Hellmut (Ed.)  
ISBN 978-3-642-84329-7
6. W.A. Goddard, D.W. Brenner, S.E. Lyshevski, G.J. Iafrate, *Handbook of nanoscience, engineering and technology*, CRC Press, 2007
7. H.S. Nalwa, *Encyclopedia of nanoscience and nanotechnology*, American Scientific Publishers, 2004

8. M.C. Petty. *Langmuir-Blodgett Films: an introduction*, Cambridge University Press, 1996
9. Y.S. Lee. *Self-assembly and Nanotechnology: a force balance approach*. Wiley\_Interscience, 2010
10. Mark Fox, *Optical Properties of Solids*, Oxford
11. Marius Grundmann, *The physics of semiconductors*, Springer
12. Mikhail I. Dyakonov, *Spin Physics in Semiconductors*, Springer
13. Philip Willmott, "An Introduction to Synchrotron Radiation: Techniques and Applications", Wiley (2011)
14. S. Hüfner, "Photoelectron Spectroscopy", Springer (1996).
15. C. Julian Chen, "Introduction to Scanning Tunnelling Microscopy", Oxford (1993).
16. M.L.Rocco et al., "Técnicas de Análise de Superfícies", Editora da UFRJ (2016).
17. *Molecular Dynamics Simulations – Elementary Methods*, J. M. Haile, John Wiley & Sons Inc., New York, 1997;
18. *Understanding Molecular Simulations – From Algorithms to Applications*, D. Frenkel and B. Smith, Academic Press, San Diego, 2002;
19. *Molecular Modeling and Simulation – An Interdisciplinary Guide*, T. Schlick, Springer, New York, 2002.
20. *Materials Modelling using Density Functional Theory - Properties and Predictions*, Feliciano Giustino, Oxford University Press, Oxford, 2014;
21. *Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods*, Richard M. Martin, Cambridge University Press, New York, 2005.
22. *Introduction to magnetic materials*, B. D. Cullit
23. *Principles of Nanomagnetism*, A. P. Guimarães
24. *Scanning probe microscopy and spectroscopy: theory, techniques and applications*. Dawn A. Bonnell (2001)
25. *Scanning Probe Microscopy – Electrical and Electromechanical Phenomena at the Nanoscale*, S.V.Kalinin e A.Gruverman
26. *Intermolecular and Surface Forces – J.N.Israelachvili*

**Obs.:**

**Serão usados também artigos científicos recentes cobrindo os diversos tópicos de estudo.**